



TITLE:

Interfacial Dynamics as Singular Limits of
Some PDEs : Method of Matched Asymptotic
Expansion (Analytical Studies for
Singularities to the Nonlinear Evolution
Equation Appearing in Mathematical
Physics)

AUTHOR(S):

飯田, 雅人

CITATION:

飯田, 雅人. Interfacial Dynamics as Singular Limits of Some PDEs : Method of Matched Asymptotic Expansion (Analytical Studies for Singularities to the Nonlinear Evolution Equation Appearing in Mathematical Physics). 数理解析研究所講究録 2000, 1123: 1-19

ISSUE DATE:

2000-01

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/63559>

RIGHT:

Interfacial Dynamics as Singular Limits of Some PDEs

— Method of Matched Asymptotic Expansion —

岩手大・教育 飯田雅人 (Masato Iida)

ABSTRACT. This article surveys a method of matched asymptotic expansion which (at least formally) reduces singularly perturbed parabolic systems describing phase separation to related interfacial dynamics. In particular, it is shown that the mean curvature flow is a singular limit of the Allen-Cahn equation and that the classical two phase Stefan problem is a singular limit of a phase field model.

1. 序

グラスにぶっかき氷を入れて熱い紅茶を注ぐと、氷が融けて減っていくのと同時に紅茶が冷やされていき、まもなくアイス・ティーが出来上がる。目で観察できる「動く界面」の身近な例である。融けつつある氷の表面が液相（紅茶が占める領域）と固相（氷が占める領域）という二つの異質な状態を分離する境界としての「界面」であり、それが氷から水への相転移に伴って「動く」のである。このように異質な2相を分離する界面が相転移に伴って動く現象は、氷と水の融解・凝固にとどまらず、金属の焼きなましに際して見られる単一構造の領域の境界である粒界 (grain boundary) の動きや、棲み分けた2種の生物個体群の間の縄張り争いなど、さまざまな場面に現れ、それらの界面の動きを記述する数理モデルとしてさまざまな曲面の発展方程式や自由境界問題が提唱されてきた。中でも平均曲率流方程式

$$(MC) \quad V = -\kappa, \quad x \in \Gamma(t), \quad t > 0$$

や (2 相) Stefan 問題

$$(St) \quad \begin{cases} u_t = \Delta u, & x \in \Omega_+(t) \cup \Omega_-(t), \quad t > 0 \\ u = 0, \quad \lambda V = - \left[\frac{\partial u}{\partial N} \right]_+^-, & x \in \Gamma(t), \quad t > 0 \end{cases}$$

は古くから知られて盛んに研究されてきた数理モデルといえるだろう。ここに、時刻 t における界面 $\Gamma(t)$ は \mathbf{R}^n の有界領域 Ω 内の状態を (何がしかの意味で) 異なる二つの相に分離していて、各相の占める部分領域は各々 $\Omega_+(t)$, $\Omega_-(t)$ で表されるものとする。また、 $\Gamma(t)$ 上の点 x に対して、 $N = N(x, t)$ は x における $\Gamma(t)$ の単位法ベクトル (向きは $\Omega_-(t)$ から $\Omega_+(t)$ へ向くものとする), $V = V(x, t)$ は x における $\Gamma(t)$ の $N(x, t)$ 向きの法速度, $\kappa = \kappa(x, t)$ は x における $\Gamma(t)$ の平均曲率 ($n-1$ 個の主曲率の総和), $[\partial u / \partial N]^\pm(x, t)$ は u を $N(x, t)$ の向きに方向微分したものの x における $\Omega_+(t)$ 側からの境界値から $\Omega_-(t)$ 側からの境界値を引いたものを表すものとする。なお、 $N(x, t)$ を法線方向には一定となるように $\Gamma(t)$ の管状近傍にまで拡張すると、 $\kappa = \operatorname{div}_x N$ と表されることに注意しておく。よって、 $\Omega_+(t)$ が凸ならば κ は至る所で負となる。

(St) では $\Omega_+(t)$ が水の領域を, $\Omega_-(t)$ が氷の領域を, $u = u(x, t)$ が温度場を表し, パラメータ $\lambda(> 0)$ は氷と水の間の相転移に伴う潜熱である.

これらのモデルが2相をくっきりと区別する「余次元1の曲面」として界面を定式化しているのに対して, 空間のスケーリングを少々変えて視ることによって界面を「とても薄い厚みのある層」と見なすモデルとして, 小さなパラメータを特異摂動的に含む反応拡散系などがある. そこでは, 界面を象徴する「薄い層」は2相の性質が急激かつ滑らかに遷移する場所として2相の中間的な状態から成る層であると考えられ, それが小さなパラメータに応じた厚みを持つ内部遷移層や角遷移層として表現されるように, モデルへのパラメータの入れ方が工夫されている.

界面を「厚みの無い曲面」と見なすモデル(曲面の発展方程式・自由境界問題)と界面を「とても薄い厚みのある層」と見なすモデル(特異摂動的な反応拡散系など)は, 界面に対する見方がまったく異なるために互いに無縁であろうと思われるかもしれないが, 実は両者は特異極限というリスケーリングによってつながっているらしいことがだんだん明らかになってきた. 実際, さまざまな反応拡散系において, 系に含まれる小さなパラメータ(達)を(適度なスケーリングで) $\rightarrow 0$ に近づけると, 解の内部遷移層(等)は厚さが 0 に近づき, 極限では「厚みの無い曲面」に退化して曲面の発展方程式あるいは自由境界問題に従って動くことが, 形式的に導かれている. 例えば, 平均曲率流方程式は Allen-Cahn 方程式の特異極限として導出され, 2相 Stefan 問題は phase field モデルの特異極限として導出されることが知られている. これらの特異極限の(少なくとも形式的な)導出に有効な手法として重宝されているのが接合漸近展開法(the methods of matched asymptotic expansion)である. また, 接合漸近展開法による形式的な特異極限の導出を正当化する研究は最近盛んに研究されつつある. 例えば, 平均曲率流方程式が Allen-Cahn 方程式の特異極限であることは Chen [16], Evans-Soner-Souganidis [19], Barles-Soner-Souganidis [14], DeMottoni-Schatzman [18]等によって既に証明されている. その内, [16]については, 本講究録内の石井克之氏による解説を参照されたい.

本稿は, 短期共同研究「数理物理に現れる非線形発展方程式の特異点の解析的研究」中に実施された集中セッション「界面と特異極限問題」における基調講演に手を加えたものであり, 接合漸近展開法の紹介を兼ねて Allen-Cahn 方程式の特異極限としての平均曲率流方程式の形式的な導出, phase field モデルの特異極限としての2相 Stefan 問題の形式的な導出を解説する. ここでの Allen-Cahn 方程式および phase field モデルとは, 十分小さな正のパラメータ ε を含む放物型方程式(系)

$$(AC) \quad \varepsilon^2 \phi_t = \varepsilon^2 \Delta \phi + f(\phi), \quad x \in \Omega, \quad t > 0,$$

$$(PF) \quad \begin{cases} \alpha \varepsilon^2 \phi_t = \varepsilon^2 \Delta \phi + f(\phi) + u, \\ u_t + \frac{\lambda}{2} \phi_t = \Delta u, \end{cases} \quad x \in \Omega, \quad t > 0$$

の各々を指すものとする. ただし, Ω は \mathbf{R}^n 内の有界領域とし, α, λ は正のパラメータであり, 関数 $f(\phi)$ は二重井戸型ポテンシャルの変分として現れる非線形項であり, 条件

- f1) $-1 < a < 1$, $f(\pm 1) = f(a) = 0$,
 $f(\phi) > 0$ for $\phi \in (-\infty, -1) \cup (a, 1)$, $f(\phi) < 0$ for $\phi \in (-1, a) \cup (1, +\infty)$;
f2) $f'(\pm 1) < 0$;
f3) $\int_{-1}^1 f(\phi) d\phi = 0$;
f4) $f'(a) > 0$

をみたすものとするが、本稿では簡単のため特に断らない限り、

$$f(\phi) = \phi(1 - \phi^2)$$

という例（この場合は $a = 0$ ）で説明していく。また、本稿では Ω 内部での界面の発展方程式を導出することに焦点を当てるため、 $\partial\Omega$ での境界条件や境界層については扱わないことにし、(MC)や(St)を扱うときにはいつも

$$\Gamma(t) \cap \partial\Omega = \emptyset$$

となることを仮定しておく。（境界付近の取り扱いには、本稿の内容とは別種の注意も必要となる。）

具体例においていざ接合漸近展開法を実行してみようとして実感することであるが、計算量もさることながら、内部展開の高次の係数の遠方での増大度を接合条件や可解条件に反しないように調節・決定していく作業が多々必要になるため、結構面倒である。さらにそれらの作業は、互いに絡み合うため一般には個別に処理するわけにもいかず、相互参照しながら並列して処理せざるを得ないので、これを手作業で混乱を来さないように見落としや間違いをすること無く進めるには、細心の注意が必要とされる。ただし、(AC) から (MC) を導出する作業は、(AC) の構造の特殊性（外部展開の係数がすべて定数になってしまうこと）が効くため、そんなに苦労せずに進めることができる。そこで、まず§2で $\lim_{\epsilon \rightarrow +0} (AC) = (MC)$ の導出を通して接合漸近展開法のアイデアと技巧の雛形を丁寧に解説し、§3では議論の筋を明らかにすることに重点を置いて計算の詳細部分は適宜省略することにしよう。本稿の議論を参考に実際に自分の手で具体例を接合漸近展開法を試みることを強くお勧めする。それが結局は理解への早道である。なお、本稿の内容は [11, Chapter 1], [17], [3, 第1章・§4.3・第5章] と密接に関連しており、本稿と合わせ読むことで接合漸近展開法に対する理解が深まるであろう。

次節以降の計算に入る前に、ここで扱う方程式 (AC), (MC), (PF), (St) の物理的な意味についてコメントしておく。

Allen-Cahn 方程式 (AC) は2相分離現象を引き起こす最も基本的な単独の双安定型反応拡散方程式としてよく用いられるが、金属をゆっくり温め冷ましていくときに単一構造（例えば、組成や結晶の向きなどがそろった秩序だった状態を意味する）の部分（粒）が成長・消滅する様子を記述する数理モデルの一つでもある。秩序変数 $\phi = \phi(x, t)$ は金属の状態（組成や結晶の向きなど）の局所的な秩序・無秩序の度合いを表す。最も整った秩序ある安定な状態がちょうど二つ存在するとして、それらを $\phi = 1$ と $\phi = -1$ で表し、それ以外の状態には秩序の乱れ具合に応じて -1 から 1 までの間の値を適当に ϕ に割り振っておく：各状態の安定性が二重井戸型ポテンシャル

$$W(\phi) = - \int_{-1}^{\phi} f(\theta) d\theta = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2$$

によって決まるようにしておくのである。 $W(\phi)$ が極小 (かつ最小) になる $\phi = \pm 1$ が安定となり、 $W(\phi)$ の二つの「井戸の深さ」が等しいので、 $\phi = \pm 1$ の安定度も等しくなる。これに金属内原子の熱運動などランダムな近接相互作用による効果を加えて金属の占める領域全体 Ω で積分したもの

$$F(\phi) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + W(\phi) \right\} dx$$

をこの系の自由エネルギーと考える。ここに、 ε はランダムな近接相互作用の影響が実質的に及ぶ距離のスケールを反映する小さなパラメータであり、後に示すように異なる2相の界面の厚み (ϕ に生ずる内部遷移層の厚み) を実質的に反映することになる。自由エネルギー $F(\phi)$ が最も速く減少するように Ω 内の秩序・無秩序状態が変遷していくものとすれば、 (Ω の境界での斉次 Neumann 境界条件のもとで時間スケールを適当に選べば) ϕ は (AC) を満足する。 ([5], [4] 等を参照。)

平均曲率流 (MC) は数学の世界では微分幾何学の研究対象として古くから有名であったが、もともとは材料科学における Mullins の論文[12]に現れたのが最初らしい。そこでは、(MC) は (AC) と同様に金属の焼きなましにおける単一構造の粒の境界 (grain boundary) の理想的な動きかたを表す数理モデルとして扱われている。(AC) では grain boundary は ε 程度の厚みを持ち、そこで相の状態が連続的に遷移するのに対し、(MC) では grain boundary は厚さ0の文字どおり曲面であり、そこで相の状態が不連続に ($\phi = -1$ から $\phi = 1$ へ) 変化する。

phase field モデル (PF) は氷から水への融解やその逆の凝固など固相・液相間の相転移を熱の流れとともに記述するモデルであり、氷と水の間の界面は氷と水の中間的な状態から成る薄い層だと見なしている。 $\phi = \phi(x, t)$ は秩序変数、 $u = u(x, t)$ は温度を表す。ここでは、 ϕ が1付近であれば液相の状態であり、 ϕ が-1付近であれば固相の状態であることを表す。(PF) の上側の方程式は (AC) の自由エネルギーを

$$\tilde{F}(\phi; u) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + \tilde{W}(\phi; u) \right\} dx$$

に変更した場合に相当する。ただし、

$$\tilde{W}(\phi; u) = - \int_{-1}^{\phi} \{f(\theta) + u\} d\theta = \frac{1}{4}(\phi^2 - 1)^2 - u\phi.$$

従って、二重井戸型ポテンシャル $\tilde{W}(\phi; u)$ の二つの安定停留点 $\phi = h_+(u)$ (液相状態) と $\phi = h_-(u)$ (固相状態) は $u > 0$ ならば $h_+(u)$ (液相) の方がより安定性が強く、 $u < 0$ ならば $h_-(u)$ (固相) の方がより安定性が強い。(PF) の下側の方程式は熱エネルギー保存則であり、 λ は相転移に伴って吸収・排出される潜熱を表す正のパラメータである。特に、左辺は系の局所的な内部エネルギー $u + 2^{-1}\lambda\phi$ の時間変化を表す。また、 α は温度の時間変化に比べて秩序変数の時間変化がどれほどゆっくり進むのかを象徴する正のパラメータである： α が大きければ大きいほど ϕ は u に比べてよりゆっくりと変化する。

2 相 Stefan 問題 (St) もまた、氷と水の間の融解・凝固に伴う界面の動きと熱の流れを記述するモデルであるが、氷と水の界面を厚さ0の文字どおり曲面として扱う。自由境界条件のうち、前半は水と氷の相転移における融点を定義し、後半は **Stefan 条件** と呼ばれて界面における熱エネルギー保存則を意味する (界面では温度一定と設定したため)。(PF) では内部遷移層において ϕ も u も滑らかに遷移するが、(St) では界面において相が不連続に ($\phi = -1$ から $\phi = 1$ へ) 変化するのみならず熱流 ($-\nabla_x u$) も不連続となる。(温度場 u は連続であるが。)

2. 平均曲率流 = ALLEN-CAHN 方程式のある特異極限

適当な初期条件のもとで (AC) の解には内部遷移層が発生し、 $\varepsilon \rightarrow +0$ のとき内部遷移層は適当な曲面 $\Gamma(t)$ に退化して (AC) の解は $\Gamma(t)$ を境にして漸近的に $+1$ に近い状態と -1 に近い状態に分かれることを形式的に導こう。そのとき、 $\Gamma(t)$ が (MC) に従って変形・移動することになる。(AC) に対して考える初期値としては、 $\bar{\Omega}$ 上で十分滑らかな関数 $\phi^* = \phi^*(x)$ であって、

$$\Omega_+^* := \{x \in \Omega \mid \phi^*(x) > 0\}, \quad \Omega_-^* := \{x \in \Omega \mid \phi^*(x) < 0\}$$

がどちらも空ではなく、

$$\Gamma^* := \{x \in \Omega \mid \phi(x) = 0\}$$

が Ω の内部に含まれた滑らかな $n-1$ 次元曲面となり、しかも

$$(1) \quad \nabla \phi^* \neq 0 \quad \text{on } \Gamma^*$$

となるようなものを選んでおく。初期値 ϕ^* に対する (AC) の解を $\phi = \phi(x, t; \varepsilon)$ と表す。 $\phi(x, t; \varepsilon)$ は x, t, ε に関して十分滑らかだとする。

2.1. 界面の発生：初期における相分離。条件(1) と条件 **f4**) によって、十分小さな ε に対して $|f(\phi^*)| \gg \varepsilon^2 |\Delta \phi^*|$ をみたすような部分領域が Ω_\pm^* の内部にそれぞれあるから、そのような場所での $t \approx 0$ における速すぎる時間発展を観察しやすくするために、 $t \approx 0$ においては時間のスケールを

$$T = \frac{t}{\varepsilon^2}$$

に変更して (AC) の解の動きを見直すことにする。 $\Delta \phi(x, \varepsilon^2 T; \varepsilon) = o(\varepsilon^{-2})$ が成り立たなくなるまでの間は

$$\phi_T = \varepsilon^2 \Delta \phi + f(\phi) \approx f(\phi)$$

となるから、それまでの間は、 $\phi(x, \varepsilon^2 T; \varepsilon) \approx \tilde{\phi}(x, T)$ と思うことにしよう。ただし、 $\tilde{\phi}$ は初期値問題

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_T = f(\tilde{\phi}), \\ \tilde{\phi}|_{T=0} = \phi^* \end{cases}$$

の解とする。この常微分方程式の平衡点の安定性を決める条件 **f1**) から、

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \tilde{\phi}(x, T) = \begin{cases} +1 & \text{if } x \in \Omega_+^*, \\ -1 & \text{if } x \in \Omega_-^*, \end{cases}$$

が成り立つ。より精密に書けば、十分大きな正数 $T_\varepsilon^* = O(|\log \varepsilon|)$ と Γ^* の適当な $O(\varepsilon)$ -近傍 Ω_ε^* があって、

$$\tilde{\phi}(x, T) = \pm 1 + O(\varepsilon^{|f'(\pm 1)|}) \quad \text{for } x \in \Omega_\pm^* \setminus \Omega_\varepsilon^*, \quad t > T_\varepsilon^*$$

が成り立つ。したがって、十分小さな ε に対しては、

$$\phi(x, \varepsilon^2 |\log \varepsilon|; \varepsilon) \approx \pm 1 \quad \text{for } x \in \Omega_\pm^* \setminus \Omega_\varepsilon^*$$

となることを期待してもよいだろう。(このことの妥当性は、初期条件にもう少しきつい条件を課した上で保証される。[16, Theorem 1]を見よ.)

つまり、(AC) の解 $\phi(x, t; \varepsilon)$ は初めのアツと言う間に、 Ω 全体を二つのほとんど一樣な状態な領域 $\Omega_+^* \setminus \Omega_\varepsilon^*$, $\Omega_-^* \setminus \Omega_\varepsilon^*$ と ϕ の値が -1 から $+1$ まで急激に遷移するような薄い層 Ω_ε^* とに分離してしまうであろう。この Ω_ε^* のような層を内部遷移層 (internal transition layer) と呼ぶ。

2.2. 2相分離後における内部遷移層の挙動の漸近解析. 2相が分離して $O(\varepsilon)$ 程度の厚みを持つ内部遷移層が発生してしまうと、そこでは $O(\varepsilon)$ 程度の狭い範囲で ϕ の値がほぼ -1 からほぼ $+1$ まで変化するから、内部遷移層では

$$|\Delta \phi| \approx \varepsilon^{-2}, \quad f(\phi) = O(1)$$

となり、もはや Laplacian の平滑効果が無視できなくなる。このため、内部遷移層は $o(\varepsilon)$ 程度にまで薄くなることはできないであろう。しかし、平滑効果が効きすぎて内部遷移層が太り返すこともないであろう。なぜなら、太り始めた途端に層内で $\Delta \phi = o(\varepsilon^{-2} |f(\phi)|)$ となるため、再び Laplacian の効果が効かなくなり、 $f(\phi)$ だけの効果によってアツと言う間に ϕ の値が ± 1 に引き戻されるはずだから。こうして、 $\varepsilon^2 \Delta \phi$ と $f(\phi)$ の効果が均衡するため、内部遷移層はそれ以上薄くなることも (また太り返すことも) なく $O(\varepsilon)$ 程度の厚みを保持し続けるはずである。ただし、内部遷移層自身が消滅したりちぎれたり、内部遷移層どうしが衝突したりするように、内部遷移層自身のトポロジーが変わり得る場合は、トポロジーが変わる直前までの間であれば $O(\varepsilon)$ 程度の厚みを保持し続けることになるだろう。

2相が分離してから内部遷移層のトポロジーが変わるまでの間、薄い内部遷移層における ϕ の形状を丁寧に見るには、そこでの局所的な空間スケールを ϕ の実状に見合ったものに取り替えた方がよい。つまり、 ϕ を詳しく解析するには、内部遷移層での解析とそれ以外の部分での解析を異なる空間スケールで別々に行った上で両者の情報をうまく貼り合わせればよいであろう。この方針に則って、 ϕ がほとんど一樣に $+1$ (または -1) に近い領域において ϕ を ε の冪級数に漸近展開したもの (外部展開: outer expansion) と、内部遷移層においては空間スケールを適当に取り直した上で ϕ を ε の冪級数に漸近展開したもの (内部展開: inner expansion) が、 Ω 上の滑らかな関数 ϕ (の近似) としてうまく貼り合わされる (接合される; match する) ように、各々の展開の係数を決めていくのが接合漸近展開 (matched asymptotic expansion) である。

2.2.1. *Outer expansion.* 内部遷移層以外の部分領域で $\phi(x, t; \varepsilon)$ が ε の形式的冪級数 $\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \phi_j(x, t)$ に漸近展開できるものとする。つまり、任意の自然数 m に対して

$$\phi(x, t; \varepsilon) - \sum_{j=0}^m \varepsilon^j \phi_j(x, t) = O(\varepsilon^{m+1})$$

が少なくとも内部遷移層を除いて一様に成り立つものと仮定する。各係数 $\phi_j(x, t)$ は有界である（ことが望ましい）。たとえ $\phi_j(x, t)$ が x, t に関して増大したとしても、各 ε について厚さ $O(\varepsilon)$ の内部遷移層を除いて一様に

$$\phi_j(x, t) = o(\varepsilon^{-1})$$

が成り立たねば、 ε の冪級数として考える意味が無くなってしまう。また、我々は $\phi(x, t; \varepsilon)$ が x, t, ε に関して十分滑らかだと仮定しているので、各係数 $\phi_j(x, t)$ は少なくとも内部遷移層を除いて滑らかなはずであるが、内部遷移層を超えて Ω 全体で滑らかにつながる保証はない。例えば、内部遷移層の厚みが $O(\varepsilon)$ だから $\varepsilon \rightarrow +0$ のとき内部遷移層は曲面に近づくであろうが、その曲面を境にして $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \phi$ の値は $(-1$ から $+1)$ へ不連続に変わるであろう。この曲面を除いて x に関して広義一様に $\phi(x, t; \varepsilon) - \phi_0(x, t)$ は 0 に収束するから、展開の係数のうち少なくとも $\phi_0(x, t)$ だけは内部遷移層を超えて連続につながることはないだろう。（すぐ後に示すように、実際 ϕ_0 だけは不連続となる。）

さて、この形式的冪級数 $\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \phi_j(x, t)$ を方程式 (AC) に形式的に代入して展開し、 ε の各冪の係数が (AC) の両辺で一致するように、各 ϕ_j を決めていきたい： $O(\varepsilon^0)$ の項の係数比較から、

$$(2) \quad f(\phi_0) = 0;$$

$O(\varepsilon^1)$ の項の係数比較から、

$$(3) \quad f'(\phi_0)\phi_1 = 0;$$

$O(\varepsilon^2)$ の項の係数比較から、

$$(4) \quad f'(\phi_0)\phi_2 = (\phi_0)_t - \Delta\phi_0 - \frac{1}{2}f''(\phi_0)\phi_1^2;$$

$O(\varepsilon^3)$ の項の係数比較から、

$$(5) \quad f'(\phi_0)\phi_3 = (\phi_1)_t - \Delta\phi_1 - f''(\phi_0)\phi_1\phi_2 - \frac{1}{3!}f'''(\phi_0)\phi_1^3;$$

⋮

が逐次得られていく。一般に $O(\varepsilon^k)$ の項の係数比較からは

$$\begin{aligned} f'(\phi_0)\phi_k &= (\phi_{k-2})_t - \Delta\phi_{k-2} \\ &\quad + (f \text{ の展開から出てくる } \phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{k-1} \text{ に関する非斉次項を含まない多項式}) \end{aligned}$$

という形の方程式が得られる。

代数方程式(2)は3根 $0, \pm 1$ を持つが、初期の2相分離が終わった後では内部遷移層の外側は状態 $\phi(x, t; \varepsilon) \approx 1$ または状態 $\phi(x, t; \varepsilon) \approx -1$ を保つはずだから、内部遷移層の外側では $\phi_0 \neq 0$ としてよい。そこで、 Ω の3つの部分 $\Omega_+(t), \Omega_-(t), \Gamma(t)$ を

$$\Omega_{\pm}(t) := \{x \in \Omega \mid \phi_0(x, t) = \pm 1\} \quad \Gamma(t) := \overline{\Omega \setminus (\Omega_+(t) \cup \Omega_-(t))}$$

で定義しよう。2相界面 $\Gamma(t)$ が任意の ε に対して厚さ $O(\varepsilon)$ の内部遷移層に含まれることに注意して、我々は（後で内部展開の議論がしやすいように）大胆に「 $\Gamma(t)$ は滑らかな $n-1$ 次元曲面であり、 t とともに滑らかに動き、 $\partial\Omega$ とは交わらない」ことを仮定しよう。ここまでの段階では、各時刻 t で $\Gamma(t)$ が Ω 内のどこにあるのか、従って $\Omega_{\pm}(t)$ がどのように動くのかについては未知のままであるが、とりあえず $\Omega_{\pm}(t)$ において外部展開の高次の係数を（できるだけ）決めておこう。ただし、以下の議論は一般には $\Gamma(t)$ のトポロジーが変わる直前までの時間内しか意味を持たないことに注意しておこう。

条件f2)のおかげで、 $\Omega_{\pm}(t)$ では $f'(\phi_0) = f'(\pm 1) < 0$ となるから、方程式 (3), (4), (5), ... は $\Omega_{\pm}(t)$ において逐次解くことができ、順に $\phi_1 = 0, \phi_2 = 0, \phi_3 = 0, \dots$ と求まる。

こうして、外部展開の係数は

$$(6) \quad \phi_0 = \pm 1, \quad \phi_j = 0 \quad (j = 1, 2, 3, \dots) \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t)$$

と決定された。この段階で既に外部展開が決まってしまったのは、あくまでも (AC) が持つ特殊な事情による：方程式が単独であり、その ε に関する最低次が未知関数の微分をまったく含まぬ代数方程式のみから成り、その零点のうち「安定な」ものすべてが退化していない。他の方程式、特に連立方程式では一般に同じようにはいかない。たいていは、方程式の外部展開の各次数の係数比較から得られる方程式の系列（Allen-Cahn 方程式の場合の(2), (3), (4), ... に相当するもの）を解くことは、絡み合った連立方程式（しばしばそのうちのいくつかが偏微分方程式であるようなもの）を解くことになり、解を一意に決定するための境界条件（自由境界条件）を捻出する必要性から、内部展開との接合条件を考慮せねばならなくなる。（§3 を参照。）

2.2.2. *Inner expansion.* 外部展開で見たように、特異極限 $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \phi(\cdot, \cdot; \varepsilon) = \phi_0$ は $\Gamma(t)$ で不連続となるので、 ϕ_0 の特異集合 $\Gamma(t)$ の付近（内部遷移層）では $\phi(\cdot, t; \varepsilon)$ の変動の実情に見合うようにリスケーリングした上で漸近展開しておくことにする。そこでまず、内部遷移層において $\Gamma(t)$ とともに動く局所動座標系で (AC) を書き直しておく。ただし、 $\Gamma(t)$ と垂直な方向を ε^{-1} 倍に引き伸ばして、 $\phi(\cdot, t, \varepsilon)$ の準特異的な状況が見かけ上解消されるようにしておく。

任意に一つ固定した時刻 t^* に対して点 $x^* \in \Gamma(t^*)$ を任意に一つ選んで固定しておく。 \mathbf{R}^{n+1} の点 (x^*, t^*) の近くで以下のように座標変換 $(x, t) \rightarrow (\rho, \sigma, t)$ を定義する。点 x から $\Gamma(t)$ へ下した垂線の足を \bar{x} と書くことにし、 x から $\Gamma(t)$ への符号付き距離 $d(x, t)$ を

$$d(x, t) := \pm |x - \bar{x}| \quad \text{for } x \in \Omega_{\pm}$$

と定義しておく。 $N = N(\bar{x}, t)$ は点 \bar{x} における $\Gamma(t)$ の単位法ベクトルのうち、 $d(\cdot, t)$ の値が増える向き（ $\Omega_-(t)$ から $\Omega_+(t)$ への向き）の方を表す。このとき、 $\rho := \varepsilon^{-1} d(x, t)$ とおき、 \bar{x} を

表す $\Gamma(t)$ に沿った局所座標を $\sigma = \sigma(\bar{x}, t) = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{n-1})$ と記すことにする. ただし, σ は局所的に \mathbf{R}^{n-1} 内の点 $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_{n-1})$ と同一視している. さて, 点 (x^*, t^*) の近傍におけるこの座標変換: $(x, t) \rightarrow (\rho, \sigma, t)$ に伴って $\phi(x, t; \varepsilon)$ を $\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon)$ と書き改めることにすると, 微分作用素は以下のように書き換えられる:

$$(7) \quad \phi_t = \partial_t \Phi + \frac{1}{\varepsilon} d_t \partial_\rho \Phi + \sum_{j=1}^{n-1} (\sigma_j)_t \partial_{\sigma_j} \Phi,$$

$$(8) \quad \nabla_x \phi = \frac{1}{\varepsilon} \partial_\rho \Phi \nabla_x d + \sum_{j=1}^{n-1} \partial_{\sigma_j} \Phi \nabla_x \sigma_j,$$

$$(9) \quad \begin{aligned} \Delta_x \phi &= \frac{1}{\varepsilon^2} |\nabla_x d|^2 \partial_{\rho\rho}^2 \Phi + \frac{1}{\varepsilon} \left((\Delta_x d) \partial_\rho \Phi + 2 \sum_{j=1}^{n-1} \langle \nabla_x d, \nabla_x \sigma_j \rangle \partial_{\rho\sigma_j}^2 \Phi \right) \\ &\quad + \left(\sum_{j,k=1}^{n-1} \langle \nabla_x \sigma_j, \nabla_x \sigma_k \rangle \partial_{\sigma_j \sigma_k}^2 \Phi + \sum_{j=1}^{n-1} (\Delta_x \sigma_j) \partial_{\sigma_j} \Phi \right) \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2} |\nabla_x d|^2 \partial_{\rho\rho}^2 \Phi + \frac{1}{\varepsilon} (\Delta_x d) \partial_\rho \Phi + \Lambda_{\Gamma^d} \Phi. \end{aligned}$$

ただし, $(\cdot)_t, \nabla_x, \Delta_x$ 等は (x, t) を独立変数と見ての微分作用素であり, $\partial_t, \partial_\rho, \partial_{\sigma_j}, \partial_{\rho\rho}^2, \partial_{\rho\sigma_j}^2, \partial_{\sigma_j \sigma_k}^2$ 等は (ρ, σ, t) を独立変数と見ての微分作用素であり, $\nabla_x d$ と $\nabla_x \sigma_j$ が直交することを用いた. また,

$$\Lambda_{\Gamma^d} := \sum_{j,k=1}^{n-1} \langle \nabla_x \sigma_j, \nabla_x \sigma_k \rangle \partial_{\sigma_j \sigma_k}^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \Delta_x \sigma_j \partial_{\sigma_j}$$

は曲面 $\Gamma^d(t) := \{y + dN(y, t) \mid y = y(\sigma, t) \in \Gamma(t)\}$ 上の Laplace-Beltrami 作用素である. 従って, (AC) は, (x^*, t^*) の近傍で $\Gamma(t)$ の動きに沿った動座標系によって書き直すと,

$$(AC)' \quad \varepsilon^2 \partial_t \Phi + \varepsilon d_t \partial_\rho \Phi + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^{n-1} (\sigma_j)_t \partial_{\sigma_j} \Phi = |\nabla_x d|^2 \partial_{\rho\rho}^2 \Phi + \varepsilon (\Delta_x d) \partial_\rho \Phi + \varepsilon^2 \Lambda_{\Gamma^d} \Phi + f(\Phi)$$

となる. さらに, 解 $\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon)$ は ρ の範囲に関しては $-\infty < \rho < +\infty$ にまで滑らかに拡張できるものと仮定しておく. (これは結構自然な仮定である. 例えば, $\Gamma(t)$ の主曲率がすべて有界であれば, 符号付き距離関数 $d(x, t)$ は $\Gamma(t)$ のある $O(1)$ -近傍 $\Omega_1(t)$ 上でうまく定義できるから, $\rho = \rho(x, t; \varepsilon)$ の値域の大きさは少なくとも $O(\varepsilon^{-1})$ 程度以上は考えられる. このときさらに, 外部展開の係数 ϕ_j とその x に関する導関数たちが $\overline{\Omega_+(t)}$ と $\overline{\Omega_-(t)}$ の各々に連続に拡張可能であれば, $\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon)$ は十分小さな ε に対して外部展開にうまく貼り合わせられるように $-\infty < \rho < +\infty$ まで自然に拡張できることが, 後出の接合条件を導く考察から推察できる.) よって今後, σ と t は局所的な独立変数として, ρ は実軸上の大域的な独立変数として扱われる.

いよいよ (AC)' の解 $\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon)$ を ε の形式的冪級数 $\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \Phi_j(\rho, \sigma, t)$ で漸近的に表して各係数を (ρ, σ, t) の滑らかな関数として求めていこう. つまり, 任意の自然数 l に対して

$$\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon) - \sum_{j=0}^l \varepsilon^j \Phi_j(\rho, \sigma, t) = O(\varepsilon^{l+1})$$

が, (σ, t) に関しては定義されている (局所的な) 範囲で ρ に関しては $-R < \rho < R$ の範囲で, 一様に成り立つように各係数を決めていく. ここで, 定数 $R = R(\varepsilon, l)$ は $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} R(\varepsilon, l) = +\infty$ をみたすものとする. この形式的冪級数を (AC)' に代入して両辺を ε の冪で形式的に展開する. このとき, 方程式の係数に現れる x, t の関数 ($d = d(x, t)$ や $\sigma = \sigma(\bar{x}, t)$ の導関数等) もすべて忘れずに独立変数 ρ, σ, t とパラメータ ε の関数と見なして ε の冪で形式的に展開しておかねばならない. なぜなら,

$$(10) \quad x = x(\rho, \sigma, t; \varepsilon) = \bar{x}(\sigma, t) + \varepsilon \rho N(\bar{x}(\sigma, t))$$

であるから, ρ, σ, t を独立変数とみなすときには x, t だけの関数として表された式も x を介して ε に依存するから. さらに,

$$(11) \quad \begin{cases} (\nabla_x d)(x, t) = N(\bar{x}, t), \\ |(\nabla_x d)(x, t)| = 1, \\ d_t(x, t) = -V(\bar{x}, t), \\ (\Delta_x d)(x, t) = (\Delta_{\bar{x}} d)(\bar{x}, t) + O(d(x, t)) = \kappa(\bar{x}, t) + O(\varepsilon \rho) \end{cases}$$

が成り立つことにも注意しておく. ここに $V(\bar{x}, t)$ は $\bar{x} \in \Gamma(t)$ における $\Gamma(t)$ の $N(\bar{x}, t)$ 向き法速度, $\kappa(\bar{x}, t)$ は $\bar{x} \in \Gamma(t)$ における $\Gamma(t)$ の平均曲率 ($n-1$ 個の主曲率の総和) を表す. こうして (AP)' の両辺を ε の各冪で等置してみると, $O(\varepsilon^0)$ の項の係数比較から

$$(12) \quad \partial_{\rho\rho}^2 \Phi_0 + f(\Phi_0) = 0$$

が得られる. (このとき, 暗に ρ の範囲を $O(\varepsilon^{-2})$ 程度に制限している.) また, ρ の範囲を $o(\varepsilon^{-1})$ 程度に制限すれば, $O(\varepsilon^1)$ の項の係数比較から

$$(13) \quad \partial_{\rho\rho}^2 \Phi_1 + f'(\Phi_0) \Phi_1 = -(V + \kappa) \partial_{\rho} \Phi_0$$

が得られる. 次に ρ の範囲を $o(\varepsilon^{-1/2})$ 程度に制限すれば, $O(\varepsilon^2)$ の項の係数比較から Φ_2 に関する方程式が得られ, さらに ρ の範囲を $o(\varepsilon^{-1/3})$ 程度に制限すれば, $O(\varepsilon^3)$ の項の係数比較から Φ_3 に関する方程式が得られ, ... という具合に逐次方程式が得られていく. Φ_j ($j \geq 1$) に対する方程式は

$$\partial_{\rho\rho}^2 \Phi_j + f'(\Phi_0) \Phi_j = (\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_{j-1} \text{ とそれらの導関数と } \rho, \sigma, t \text{ の式})$$

という形になり, σ と t をパラメータと思えば, これらはすべて変数 ρ に関する楕円型方程式と見なせる. 当然のことながら, これらの方程式にはもはやパラメータ ε は含まれない. さらに, 任意の自然数 l を固定する毎に $0 < L < 1/l$ なる定数 L を一つ決めれば, 未知関数 Φ_j ($0 \leq j \leq l$) の方程式は任意の ε に対して $-\varepsilon^{-L} < \rho < \varepsilon^{-L}$ の範囲で成り立つから, 結局, どの方程式も $-\infty < \rho < +\infty$ の範囲で成り立たねばならない.

2.2.3. *Matching*. 内部展開で求めた Φ_j に関する方程式は無限領域 $-\infty < \rho < +\infty$ における半線形楕円型方程式（または非斉次の線形楕円型方程式）であるから、そもそも解の存在すら前もってはわからない。解が存在するためには、非線形性が適度な条件を満足し、さらに（Fredholm の交代定理に従って）関数空間において非斉次項が適当な方向には退化していなければならない。これらの条件が満足された場合には、一般に解は無数に現れてしまうが、我々の目的に合わない解に用はない。我々が望む解は、外部展開と内部展開が Ω 全体での滑らかな関数 $\phi(x, t; \varepsilon)$ の十分良い近似になるように両者が内部遷移層と $\Omega_{\pm}(t)$ の重なる部分で滑らかにつながる（接合する）ような解である。この「接合条件」によって、一つの外部展開に対して内部展開の各楕円型方程式の解が「本質的には一意に」（たいていの場合、「 Φ_0 等の低次係数に ρ に関する平行移動の分だけ自由度が残る」という意味で）選ばれるはずなのだ。仮に一つの外部展開に対して接合条件をみたすような解が内部展開の方程式にたくさん現れてしまったら、近似の候補の自由度が多すぎて最良近似を決められなくなり、近似の精度も「がた落ち」するであろう。そんな場合はそもそも試みている漸近展開の初めの設定（スケーリングの選びかたなど）がまずかったと思って、設定そのものを再検討してみることをお勧めする。

逆に外部展開の方も、内部展開との接合によって制約を受ける。事実、内部展開の係数が満たすべき楕円型方程式の可解条件は、接合条件を介して外部展開を制約するのだ。それは $\Gamma(t)$ においてなめらかにつながらない外部展開の $\Omega_+(t)$ 側からの極限と $\Omega_-(t)$ 側からの極限との間に、適当な整合性を要請している。また、内部展開の楕円型方程式の係数や非斉次項には $\Gamma(t)$ の運動に関する情報（速度など）や形状に関する情報（曲率など）が $\Gamma(t)$ といっしょに運動・変形する動座標系への変換に伴って）自然に入るから、この楕円型方程式に対する可解条件は $\Gamma(t)$ 自身の運動や変形をも制約する。このようなわけで、内部展開の楕円型方程式に対する可解条件が（内部展開を見るには粗すぎる元来の空間スケーリングで見ていると）「自由境界条件」や「曲面の発展方程式」に姿を替えて界面上に縮約されることになる。

上に書いたことを (AC) に対して具体的に実行してみよう。

外部展開と内部展開の間の接合条件 (**mathing condition**) は、一般に次の形式で与えることができる：

$$(14) \quad \Phi_0(\rho, \sigma, t) = \phi_0(\bar{x} \pm 0N, t) + o(1),$$

$$(15) \quad \Phi_1(\rho, \sigma, t) = \phi_1(\bar{x} \pm 0N, t) + \rho \frac{\partial \phi_0}{\partial N}(\bar{x} \pm 0N, t) + o(1),$$

$$(16) \quad \Phi_2(\rho, \sigma, t) = \phi_2(\bar{x} \pm 0N, t) + \rho \frac{\partial \phi_1}{\partial N}(\bar{x} \pm 0N, t) + \frac{\rho^2}{2} \frac{\partial^2 \phi_0}{\partial N^2}(\bar{x} \pm 0N, t) + o(1),$$

⋮

as $\rho \rightarrow \pm\infty$.

この条件は、外部展開が界面までは十分滑らかに拡張できるものとして、その各係数を、 $\Gamma(t)$ の近くで $x = \bar{x} + \varepsilon \rho N$ を利用して内部変数で書き直した後、 $\overline{\Omega_+}(t)$ と $\overline{\Omega_-}(t)$ で別々に ε に関して形

式的に Taylor 展開したもの

$$\begin{aligned}
 \phi(x, t; \varepsilon) &\approx \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \phi_k(\bar{x} + \varepsilon \rho N, t) \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon^k \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(\varepsilon \rho)^l}{l!} \frac{\partial^l \phi_k}{\partial N^l}(\bar{x} \pm 0N, t) \\
 &= \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \sum_{l=0}^j \frac{\rho^l}{l!} \frac{\partial^l \phi_{j-l}}{\partial N^l}(\bar{x} \pm 0N) \quad \text{for } x \in \overline{\Omega_{\pm}(t)}
 \end{aligned}$$

と内部展開

$$\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon) \approx \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \Phi_j(\rho, \sigma, t)$$

が十分大きな ρ において ε の冪級数として漸近的に一致するための条件として導かれる。ただし、十分大きな ρ に対してはこの冪級数は一般に収束しないから、実際には任意の自然数 m に対して $0 < \mu < 1/m$ なる定数 μ を選んで、 $\rho \approx \varepsilon^{-\mu}$ 程度に大きな ρ に対して m 次までの展開の各係数が漸近的に一致するように考えるのである。(この ρ は $\varepsilon \rho^m = o(1)$ を満たすから、 m 次までの各係数はこの程度に大きい ρ に対しても高々 $o(\varepsilon^{-1})$ 程度にとどまるので、各係数の漸近的な一致が保証されるのである。このとき、 $d(x, t) \approx \varepsilon^{1-\mu} = o(1)$ であることに注意。)

さて、外部展開の計算結果に接合条件 (14), (15), (16), ... を当てはめてみると、

$$\Phi_0(\pm\infty, \sigma, t) = \pm 1, \quad \Phi_j(\pm\infty, \sigma, t) = 0 \quad (j \geq 1)$$

となる。これらを無限遠での境界条件だと思って $\Phi_0, \Phi_1, \Phi_2, \dots$ に対する楕円型方程式を逐次的に解いていけばよい。

まず、半線形楕円型方程式 (12) が境界条件 $\Phi_0|_{\rho=\pm\infty} = \pm 1$ のもとで、 ρ 方向の平行移動の自由度を除いて、ただ一つの解を持つことは有名な事実である。このことは条件 **f1**), **f2**), **f3**) によって保証される。(例えば [2, Section 5.4] を参照。) しかも、方程式も境界条件も σ, t に依らないからこの解は σ, t に依らない。ここでは便宜上 $\Phi_0|_{\rho=0} = 0$ となる解 $\Phi_0(\rho, \sigma, t) = \psi(\rho)$ を選んでおく。(実は、 $f(\phi) = \phi(1 - \phi^2)$ の場合は解 ψ は陽に $\psi(\rho) = \tanh(\rho/\sqrt{2})$ と書き下されることが Huxley によって見つかっている。)

次にこの ψ に対し、非斉次の線形楕円型方程式 (13) を境界条件 $\Phi_1|_{\rho=\pm\infty} = 0$ のもとで解こう。非斉次項 $-(V + \kappa)\partial_\rho \psi$ は ρ の関数として $L^2(\mathbf{R})$ に属すから、Fredholm の交代定理を $L^2(\mathbf{R})$ で適用できる。ところで、左辺の楕円型作用素 $\partial_{\rho\rho}^2 + f'(\psi)$ は自己共役であり、0 を固有値として持ち、 $\psi'(\rho)$ が固有関数となることは、(12) の両辺を ρ で微分してみればわかる。固有値 0 が単純であることも知られている (例えば [2, p.131], [11, p.10] 等を参照)。よって、境界条件 $\Phi_1|_{\rho=\pm\infty} = 0$ のもとで (13) が解を持つための条件は、右辺が ψ' と $L^2(\mathbf{R})$ で直交することである

(可解条件). 即ち,

$$(17) \quad -(V + \kappa) \int_{-\infty}^{+\infty} \psi'(\rho)^2 d\rho = 0.$$

ここで, (12) の解 $\psi(\rho)$ は増加関数であるから, この可解条件は結局, 界面 $\Gamma(t)$ の挙動を規定する

$$V + \kappa = 0$$

に帰着される. さらにこのとき, (13) の右辺は 0 になってしまうから, 解は ρ に依らない関数 $b(\sigma, t)$ を用いて

$$\Phi_1(\rho, \sigma, t) = b(\sigma, t)\psi'(\rho)$$

と書ける. 係数 $b(\sigma, t)$ はさらに高次の展開に対する可解条件によって定まることに注意しておく. 実際, (AC) では $O(\varepsilon^3)$ の係数比較から得られる Φ_3 についての非斉次楕円型方程式にたいする可解条件が $b(\sigma, t)$ についての半線形放物型方程式に帰着され, その解として $b(\sigma, t)$ は決定される.

さらに, この操作を繰り返していき, Φ_2 以降の係数も順次決定されていくが, 略す. ただし, 他の方程式に対して接合漸近展開法を適用する際の注意を付しておく. (AC) の場合は, 内部展開に対する可解条件を考える際, 非斉次項が $L^2(\mathbf{R})$ に入るのでそのまま $L^2(\mathbf{R})$ の枠組で Fredholm の交代定理を適用できた. しかしながら一般には, Φ_j や非斉次項は ρ に関して遠方で $O(\rho^j)$ 程度の増大度を持つため $L^2(\mathbf{R})$ に入らなくなり, Fredholm の交代定理をそのまま適用するわけにはいかない. そのような場合には, Φ_j を「 $\rho \rightarrow +\infty$ で増大する部分」と「 $\rho \rightarrow -\infty$ で増大する部分」と「 $\rho \rightarrow \pm\infty$ で減衰する部分」にうまく分解してから, 増大する部分は接合条件によって規定し, 減衰する部分に Fredholm 理論を適用すればよい.

ここまでの形式的導出によって得られたことを元来の空間スケールを用いてまとめておくと, $t \approx 0$ で Ω 内は界面 $\Gamma(t)$ によって 2 つの領域 $\Omega_{\pm}(t)$ にほぼ分離され, $\Gamma(t)$ の適当な ε -近傍 $\Omega_{\varepsilon}(t)$ が ϕ の内部遷移層となり, $\phi = \phi(x, t; \varepsilon)$ は任意の k に対して

$$f(\phi) = O(\varepsilon^k) \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t) \setminus \Omega_{\varepsilon}(t)$$

を満たす. (実は,

$$\phi = \pm 1 + O(\varepsilon^k) \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t) \setminus \Omega_{\varepsilon}(t)$$

である.) さらに, $\Gamma(t)$ は平均曲率流方程式

$$V = -\kappa \quad \text{on } \Gamma(t)$$

に従って変形・移動する.

3. 2 相 STEFAN 問題 = PHASE FIELD モデルのある特異極限

前節で紹介した接合漸近展開法を用いて, (PF) の適当な特異極限として (St) を導出しよう. ここで, (PF) には ε 以外にもパラメータとして α, λ が含まれているので, α, λ と ε との関係のあり方に応じて特異極限として導かれる自由境界問題が異なり得ることに注意しよう. また,

2相分離現象のモデルとしては、秩序変数 ϕ の大きさは殆ど至る所 ε^0 程度であるのが自然であろうが、温度場 u の大きさは $o(\varepsilon^0)$ である方が自然な問題設定であることもある。例えば、0度Cに近い水で占められた領域 Ω を $\partial\Omega$ で冷却して Ω 内をどんどん凝固させていく場合に、 $\partial\Omega$ での冷却度を小さくしておけば、温度場 $u(x, t)$ は一様に 0 に近いであろう。実際、(St) を (PF) の特異極限と見なすときには

$$\varepsilon = o(\delta), \quad \alpha \approx 1, \quad \lambda = O(\delta), \quad u = O(\delta) \quad \text{as } \delta \rightarrow +0$$

という状況で (PF) を考えるのである。

しかし、いずれにせよ、 ϕ に対する自由エネルギー $\tilde{F}(\phi; u) = \int_{\Omega} \left\{ \frac{\varepsilon^2}{2} |\nabla \phi|^2 + \tilde{W}(\phi; u) \right\} dx$ においてランダムな近接相互作用が効力をもつ距離のスケールを表すパラメータ ε が、 ϕ の内部遷移層の厚みを決めるというからくりは (AC) の場合と変わらない。そこで本節では、まずこの ε を基準のパラメータと見なして (PF) の解を接合漸近展開して特異極限の候補を導いた上で、特に

$$(18) \quad \varepsilon = \delta^2, \quad \alpha = 1, \quad \lambda = \delta \bar{\lambda}, \quad u = \delta \bar{u} \quad \text{as } \delta \rightarrow +0$$

というスケーリングで見直すと、その特異極限が (St) になることを示すことにしよう。級数展開の冪の基準パラメータとして δ の代わりに ε を採用することで、接合条件が煩雑になるのを防ぐと同時に、本節とは異なるスケーリングに対する特異極限を統一的に導くことも可能になる ([3, §5.3] 参照)。

一方、(PF) において、十分小さな ε と適当な初期条件のもとで、 $t \approx 0$ で Ω が2相に分離して界面が生成されることは、(AC) の場合と同様に形式的議論で導けるが、界面での u の特異性に関しては若干の注意を要する。結論としては、初めのアツと言う間に ϕ には厚み $O(\varepsilon)$ 程度の内部遷移層が生じ、そこは u にとっては角遷移層 (即ち、 u そのものの値がほとんど変化しない代わりに ∇u の値が急激に遷移する薄い層) となる。ただし、 u に関して角遷移層が生成されることを見出すには、 t の他に新たに二つの異なる時間スケール $\varepsilon^{-2}t$, $\varepsilon^{-1}t$ でのダイナミクスを考える必要が生ずる。本節ではそこへ深入りするのはやめて、 Ω が既に2相に分離した後での (PF) の解 $(\phi, u) = (\phi(x, t; \varepsilon), u(x, t; \varepsilon))$ の漸近的な様子を接合漸近展開法で調べることにする。

3.1. Outer expansion. 分離した2相 (固相と液相) の境付近を除いて、 $\phi(x, t; \varepsilon)$ と $u(x, t; \varepsilon)$ が形式的冪級数 $\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \phi_j(x, t)$ と $\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j u_j(x, t)$ に漸近展開されるものとして、これを (PF) に代入して ε の各冪の係数が両辺で一致するように、各 (ϕ_j, u_j) を決めていく: $O(\varepsilon^0)$ の項の係数比較から、

$$(19) \quad \begin{cases} f(\phi_0) + u_0 = 0, \\ (u_0)_t + \frac{\lambda}{2}(\phi_0)_t = \Delta u_0 \end{cases}$$

が、 $O(\varepsilon^1)$ の項の係数比較から、

$$(20) \quad \begin{cases} f'(\phi_0)\phi_1 + u_1 = 0, \\ (u_1)_t + \frac{\lambda}{2}(\phi_1)_t = \Delta u_1 \end{cases}$$

が得られる．($O(\varepsilon^2)$ の項以降の考察は略す．)

我々は温度場 $u(x, t; \varepsilon)$ が 0 に近い場合を考えるので，(19) の上側の代数方程式は異なる 3 根 $\phi_0 = h_-(u_0)$, $\phi_0 = h_0(u_0)$, $\phi_0 = h_+(u_0)$ を持つとしてよい．ただし， $-1 \approx h_-(u_0) < h_0(u_0) < h_+(u_0) \approx +1$ である．そこで，固相では $\phi_0 = h_-(u_0)$ ，液相では $\phi_0 = h_+(u_0)$ となっているものと期待して，

$$\Omega_{\pm}(t) := \{x \in \Omega \mid \phi_0(x, t) = h_{\pm}(u_0(x, t))\} \quad \Gamma(t) := \overline{\Omega \setminus (\Omega_+(t) \cup \Omega_-(t))}$$

と定義しておく．(さらに， u に対する角遷移層生成過程を考慮することにより，

$$\inf_{\Omega_+(t)} u_0 \geq \sup_{\Omega_-(t)} u_0$$

としてよいことがわかる．) 前節と同様，外部展開・内部展開の係数がうまく定義できるように，「 $\Gamma(t)$ は滑らかな $n-1$ 次元曲面であり， t とともに滑らかに動き， $\partial\Omega$ とは交わらない」ことを仮定し，「 $\Gamma(t)$ のトポロジーが変わらない」ような時間内で以下の議論を進めることにする．

条件 f2)のもとでは， $\Omega_{\pm}(t)$ 上 $f'(\phi_0) = f'(h_{\pm}(u_0)) < 0$ となる (我々が望む解では $u_0(x, t) \approx 0$ であることに注意) から，(20) の上側の方程式から， $\phi_1 = -u_1/f'(\phi_0)$ と表せることがわかる．

従って，外部展開の初めの 2 項の係数は，

$$\begin{aligned} \phi_0 &= h_{\pm}(u_0), \quad \phi_1 = -\frac{u_1}{f'(h_{\pm}(u_0))} \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t) \\ (u_0 + \frac{\lambda}{2}h_{\pm}(u_0))_t &= \Delta u_0, \quad \left(\left\{ 1 - \frac{\lambda}{2f'(h_{\pm}(u_0))} \right\} u_1 \right)_t = \Delta u_1 \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t) \end{aligned}$$

をみたさねばならない．部分領域 $\Omega_{\pm}(t)$ での $\phi_0(x, t)$, $\phi_1(x, t)$ は $u_0(x, t)$, $u_1(x, t)$ によって決まり， $f(\phi) + u = 0$ の零集合の特徴を考慮すると，界面 $\Gamma(t)$ において ϕ_0 は不連続となる．しかしながら， $\Omega_{\pm}(t)$ の各々で (非) 線形熱方程式を満たす $u_0(x, t)$, $u_1(x, t)$ を決定するためには， $\Omega_{\pm}(t)$ の共通境界としての $\Gamma(t)$ での境界条件が必要である．しかも， $\Gamma(t)$ の動き方を指定する条件も未知である．これらは内部展開との接合を考慮することにより得られることになる．

3.2. Inner expansion. 前節と同様に， $\phi(\cdot, t; \varepsilon)$ の内部遷移層では，その厚さを考慮して $\Gamma(t)$ と垂直な方向を ε^{-1} 倍に引き伸ばして， $\Gamma(t)$ とともに動く局所動座標系 (ρ, σ, t) を導入し， $(\phi(x, t; \varepsilon), u(x, t; \varepsilon))$ を $(\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon), U(\rho, \sigma, t; \varepsilon))$ と表す．この局所座標系のもとでは，(PF) は

$$(PF)' \quad \left\{ \begin{aligned} & \alpha \left(\varepsilon^2 \partial_t \Phi + \varepsilon d_t \partial_{\rho} \Phi + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^{n-1} (\sigma_j)_t \partial_{\sigma_j} \Phi \right) \\ & = |\nabla_x d|^2 \partial_{\rho\rho}^2 \Phi + \varepsilon (\Delta_x d) \partial_{\rho} \Phi + \varepsilon^2 \Lambda_{\Gamma d} \Phi + f(\Phi) + U, \\ & \varepsilon^2 \partial_t (U + \frac{\lambda}{2} \Phi) + \varepsilon d_t \partial_{\rho} (U + \frac{\lambda}{2} \Phi) + \varepsilon^2 \sum_{j=1}^{n-1} (\sigma_j)_t \partial_{\sigma_j} (U + \frac{\lambda}{2} \Phi) \\ & = |\nabla_x d|^2 \partial_{\rho\rho}^2 U + \varepsilon (\Delta_x d) \partial_{\rho} U + \varepsilon^2 \Lambda_{\Gamma d} U \end{aligned} \right.$$

と書き直される．

さて, $(PF)'$ の解 $(\Phi(\rho, \sigma, t; \varepsilon), U(\rho, \sigma, t; \varepsilon))$ が (σ, t) に関しては局所的に, ρ に関しては実軸上で広義一様に, 形式的冪級数 $(\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j \Phi_j(\rho, \sigma, t), \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j U_j(\rho, \sigma, t))$ に漸近展開されるものとして各係数を (ρ, σ, t) の滑らかな関数として決めよう. この漸近展開を $(PF)'$ に代入し, (10)と(11)に注意しながら $(PF)'$ の係数すべてを独立変数 (ρ, σ, t) の関数を係数に持つ ε の冪級数に展開した上で, ε の各冪について係数を比較する: $O(\varepsilon^0)$ の項の係数から,

$$(21) \quad \begin{cases} \partial_{\rho\rho}^2 \Phi_0 + f(\Phi_0) + U_0 = 0, \\ \partial_{\rho\rho}^2 U_0 = 0 \end{cases}$$

が得られ, ρ の範囲を $o(\varepsilon^{-1})$ 程度に制限すれば, $O(\varepsilon^1)$ の項の係数から,

$$(22) \quad \begin{cases} \partial_{\rho\rho}^2 \Phi_1 + f'(\Phi_0)\Phi_1 = -U_1 - (\alpha V + \kappa)\partial_\rho \Phi_0, \\ \partial_{\rho\rho}^2 U_1 = -(V + \kappa)\partial_\rho U_0 - \frac{\lambda}{2}V\partial_\rho \Phi_0 \end{cases}$$

が得られる ($O(\varepsilon^2)$ の項以降の考察は略す). これらの方程式は, もはや ε に依存しないから, 変数 ρ に関しては結局 $-\infty < \rho < +\infty$ の範囲で成り立たねばならない.

3.3. Matching. 外部展開と内部展開の間の接合条件として, $\{\phi_j\}_{j=0}^{\infty}$ と $\{\Phi_j\}_{j=0}^{\infty}$ の間には (14), (15), (16), ... を, $\{u_j\}_{j=0}^{\infty}$ と $\{U_j\}_{j=0}^{\infty}$ の間にも同様な条件を課しておく. これらの接合条件のもとで, 内部展開の係数を定める各方程式に対して可解条件を求めると, それらが $\{u_j\}_{j=0}^{\infty}$ を決定する (非) 線形熱方程式に対する $\Gamma(t)$ 上での境界条件および $\Gamma(t)$ の動きを決定する「界面の発展方程式」になる.

まず, (21) の下側の方程式と接合条件から, $U_0(\rho, \sigma, t)$ は各 (σ, t) に対して,

$$\begin{cases} \partial_{\rho\rho}^2 U_0 = 0, & -\infty < \rho < +\infty, \\ U_0|_{\rho=\pm\infty} = u_0|_{x=\bar{x}\pm 0N} \end{cases}$$

を満たすので, ρ に関して有界な一次関数でなければならない. よって,

$$\begin{aligned} u_0|_{x=\bar{x}+0N} &= u_0|_{x=\bar{x}-0N} (= u_0(\bar{x}, t)), \\ U_0(\rho, \sigma, t) &= u_0(\bar{x}(\sigma, t), t). \end{aligned}$$

従って, (21) の上側の方程式と接合条件から, $\Phi_0(\rho, \sigma, t)$ は各 (σ, t) に対して,

$$(23) \quad \begin{cases} \partial_{\rho\rho}^2 \Phi_0 + f(\Phi_0) + u_0(\bar{x}, t) = 0, & -\infty < \rho < +\infty, \\ \Phi_0|_{\rho=\pm\infty} = h_{\pm}(u_0(\bar{x}, t)) \end{cases}$$

を満たさねばならない. ここで, 条件 **f1**), **f3**) によって

$$\int_{h_-(u)}^{h_+(u)} \{f(\phi) + u\} d\phi \neq 0 \quad \text{for } u \neq 0$$

となることが保証されるので, (23) を満たす Φ_0 が存在するのは $u_0(\bar{x}, t) = 0$ の時に限る (例えば [2, §5.4] 等参照). 即ち,

$$\begin{aligned} u_0|_{x=\bar{x}\pm 0N} &= 0 \quad \text{for } \bar{x} \in \Gamma(t), \\ U_0(\rho, \sigma, t) &\equiv 0. \end{aligned}$$

この時、 Φ_0 は ρ に関する平行移動の自由度を除いて一意に決まるので、ここでは、(AC) の内部展開の 0 次項と同様に $\Phi_0(0, \sigma, t) = 0$ を満たす

$$\Phi_0(\rho, \sigma, t) = \psi(\rho)$$

を選んでおく.

次に、(22) の下側の方程式から、 $U_1(\rho, \sigma, t)$ は各 (σ, t) に対して

$$\partial_{\rho\rho}^2 U_1 = -\frac{\lambda}{2} V \psi'(\rho), \quad -\infty < \rho < +\infty$$

を満たすので、 ρ について 1 回積分すると、 ρ によらない関数 $c(\sigma, t)$ を用いて

$$\partial_{\rho} U_1 = -\frac{\lambda}{2} V \psi(\rho) + c(\sigma, t), \quad -\infty < \rho < +\infty$$

と表せる. ここで、接合条件から

$$\partial_{\rho} U_1|_{\rho=\pm\infty} = \frac{\partial u_0}{\partial N} \Big|_{x=\bar{x}\pm 0N}$$

が要請されるので、

$$\frac{\partial u_0}{\partial N} \Big|_{x=\bar{x}\pm 0N} = \mp \frac{\lambda}{2} V + c(\sigma, t)$$

が成り立ち、ここから $c(\sigma, t)$ を消去して、

$$\lambda V = - \left[\frac{\partial u_0}{\partial N} \right]_-^+ := - \left(\frac{\partial u_0}{\partial N} \Big|_{x=\bar{x}+0N} - \frac{\partial u_0}{\partial N} \Big|_{x=\bar{x}-0N} \right)$$

を得る.

ここまでの議論の成果を u_0 のみに関して整理すると、 $u = u(x, t; \varepsilon)$ が

$$(24) \quad \begin{cases} \left(u + \frac{\lambda}{2} h_{\pm}(u) \right)_t = \Delta u + O(\varepsilon) & \text{in } \Omega_{\pm}(t) \\ u = O(\varepsilon), \quad \lambda V = - \left[\frac{\partial u}{\partial N} \right]_-^+ + O(\varepsilon) & \text{on } \Gamma(t) \end{cases}$$

を満たすことがわかる. 我々の目標である (St) を導くにはこれで十分であるが、 $\varepsilon, \alpha, \lambda, u$ (とさらに t) に対するスケーリングをいろいろ取り替えて様々な特異極限を導くには、(24) の $O(\varepsilon)$ の部分を高次の項まで正確に表す必要があり、そのためには、外部展開・内部展開のより高次の係数に対する接合条件・可解条件を計算しておかねばならない ([3, §5.3] 参照).

さて、(24) を (18) というスケーリングで見直すことにしよう. 十分小さな正の数 δ に対して、 $u = \delta \bar{u}$ ($\bar{u} = O(1)$) と見なせる場合には、

$$h_{\pm}(u) = \pm 1 - \frac{\delta \bar{u}}{f'(\pm 1)} + O(\delta^2)$$

が成り立つことに注意しておく。ここで、複号は $\bar{u} > 0$ のとき $+$ を、 $\bar{u} < 0$ のとき $-$ を意味する。よって、 $(h_{\pm}(u))_t$ において ± 1 の時間による微分が消えるから、(24) は

$$\begin{cases} \left(1 - \frac{\lambda}{2f'(\pm 1)}\right) \bar{u}_t + O(\delta) = \Delta \bar{u} + O\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right) & \text{in } \Omega_{\pm}(t), \\ \bar{u} = O\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right), \quad \frac{\lambda}{\delta} V = -\left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial N}\right]_{-}^{+} + O\left(\frac{\varepsilon}{\delta}\right) & \text{on } \Gamma(t) \end{cases}$$

となる。従って、潜熱 λ が小さくて温度も 0 度 C に近い場合には $\varepsilon, \lambda, \delta$ の関係を

$$\varepsilon = \delta^2, \quad \lambda = \delta \bar{\lambda} \quad (\bar{\lambda} = O(1))$$

となるように選べば、 $\varepsilon = +0$ の特異極限において、

$$\begin{cases} \bar{u}_t = \Delta \bar{u} & \text{in } \Omega_{\pm}(t) \\ \bar{u} = 0, \quad \bar{\lambda} V = -\left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial N}\right]_{-}^{+} & \text{on } \Gamma(t) \end{cases}$$

が成り立つ。したがって、(PF) は、 $\lambda = O(\sqrt{\varepsilon})$, $u = O(\sqrt{\varepsilon})$ in Ω というスケーリングで見れば、

$$\begin{cases} u_t = \Delta u + O(\varepsilon) & \text{in } \Omega_{\pm}(t), \\ u = 0 + O(\varepsilon), \quad \lambda V = -\left[\frac{\partial u}{\partial N}\right]_{-}^{+} + O(\varepsilon) & \text{on } \Gamma(t) \end{cases}$$

と

$$\phi = h_{\pm}(u) + O(\varepsilon) \quad \text{in } \Omega_{\pm}(t)$$

に帰着されるので、 $u(x, t; \varepsilon)$ が漸近的に (St) を満たすと考えてよいだろう。

お詫び 数理研の短期共同研究が終了してからかなり時間がたつのに、本稿の筆がなかなか進まなかったのは、ひとえに筆者の力不足と怠慢のためである。私の原稿提出が大幅に遅れ、そのために講究録の出版そのものが遅くなってしまい、研究協力者のみなさんに多大な迷惑をおかけしたことをお詫び致します。特に、筆者の原稿の「度重なる遅れ」にもかかわらず辛抱し続けて待って下さった研究代表者の小川卓克氏には、陳謝します。

REFERENCES

- [1] 儀我・陳 (1996). 動く曲面を追いかけて (チュートリアル 応用数理の最前線), 日本評論社.
- [2] HENRY (1981). Geometric Theory of Semilinear Parabolic Equations (Lec. Notes in Math. 840), Springer.
- [3] 西浦 (1999). 非線形問題 1—パターン形成の数理 (岩波講座 現代数学の展開 7), 岩波書店.
- [4] 太田 (1997). 界面ダイナミクスの数理 (チュートリアル 応用数理の最前線), 日本評論社.

モデルとしての方程式の由来, 特異極限の形式的導出

- [5] ALLEN, S. M. AND CAHN, J. W. (1979). A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening, *Acta Metall.*, **27**, 1085–1095.

- [6] CAGINALP, G. (1986). An analysis of a phase field model of a free boundary, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **92**, 205–245.
- [7] CAGINALP, G. (1991). Phase field models and sharp interface limits: some differences in subtle situations, *Rocky Mountain J. Math.*, **21**, 603–616.
- [8] CAGINALP, G. AND FIFE, P. C. (1988). Dynamics of layered interfaces arising from phase boundaries, *SIAM J. Appl. Math.*, **48**, 506–518.
- [9] CAHN, J. W., ELLIOTT, C. M. AND NOVICK-COHEN, A. (1996). The Cahn-Hilliard equation with concentration dependent mobility: motion by minus the Laplacian of the mean curvature, *European J. Appl. Math.*, **7**, 287–301.
- [10] CAHN, J. W. AND HILLIARD, J. E. (1957). Free energy of a nonuniform system I. Interfacial free energy, *J. Chem. Phys.*, **28**, 258–267.
- [11] FIFE, P. C. (1988). Dynamics of Internal Layers and Diffusive Interfaces (CBMS-NSF Reg. Conf. Ser. Appl. Math. **53**), *SIAM*.
- [12] MULLINS, W. W. (1956). Two-dimensional motion of idealized grain boundaries, *J. Appl. Phys.*, **27**, 900–904.

特異極限操作の正当化

- [13] ALIKAKOS, N. D., BATES, P. W. AND CHEN, X.-F. (1994). Convergence of the Cahn-Hilliard equation to the Hele-Shaw model, *Arch. Rat. Mech. Anal.*, **128**, 165–205.
- [14] BARLES, G., SONER, H. M. AND SOUGANIDIS, P. E. (1993). Front propagation and phase field theory, *SIAM J. Control Optim.*, **31**, 439–469.
- [15] CAGINALP, G., AND CHEN, X.-F. (1992). Phase field equations in the singular limit of sharp interface problems, "On the Evolution of Phase Boundaries" (M. Gurtin and G. B. McFadden ed.) *IMA Volume of Mathematics and Its Applications* **43**, Springer-Verlag, 1–28.
- [16] CHEN, X.-F. (1992). Generation and propagation of interfaces for reaction-diffusion equations, *J. Differential Equations*, **96**, 116–141.
- [17] CHEN, X.-F. (1998). Rigorous verifications of formal asymptotic expansions, "Proceedings: Asymptotics in Nonlinear Diffusive Systems" (Y. Nishiura, I. Takagi and E. Yanagida ed.) *Tohoku Mathematical Publications* **8**, Tohoku Univ., 9–33. **See also the references therein.**
- [18] DEMOTTONI, P. AND SCHATZMAN, M. (1995). Geometrical evolution of developed interfaces, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **347**, 1533–1589.
- [19] EVANS, L. C., SONER, H. M. AND SOUGANIDIS, P. E. (1992). The Allen-Cahn equation and the generalized motion by mean curvature, *Comm. Pure Appl. Math.*, **XLV**, 1097–1123.